

## 연속흐름 반응기에서 광촉매 반응에 의한 VOC 물질제거 특성에 대한 수치적 연구

최 우 혁<sup>†</sup>, 김 창 녕<sup>\*</sup>, 정 석 진<sup>\*\*</sup>

경희대학교 기계공학과, \*경희대학교 기계산업시스템공학부, \*\*경희대학교 환경응용화학공학부

### A Numerical Analysis of the Abatement of VOC with Photocatalytic Reaction in a Flow Reactor

Woo Huck Choi<sup>†</sup>, Chang Nyung Kim<sup>\*</sup>, Suk Jin Choung<sup>\*\*</sup>

*Mechanical Engineering Department, Graduate School of Kyunghee University, Yongin 449-701, Korea*

*\*College of Mechanical & Industrial System Engineering, Kyunghee University, Yongin 449-701, Korea*

*\*\*College of Environmental Science and Applied Chemistry, Kyunghee University, Yongin 449-701, Korea*

(Received May 2, 2001; revision received June 4, 2001)

**ABSTRACT:** VOC (Volatile Organic Compound) removal characteristics in continuous flow reactors have been numerically investigated. The photocatalytic reaction have been simulated with the binding constant and the reaction rate constant obtained from experimental data for the constant-volume batch reactor, and then VOC abatement in continuous flow reactors with the same conditions as those of batch reactor has been analyzed. The standard  $k-\epsilon$  model and mass conservation equation have been employed for numerical calculation, and heterogeneous reaction rate has been used in terms of the boundary condition of the conservation equation. In the case of the continuous flow reactor, reaction characteristics have been estimated with various inlet velocities and with different number of baffles. The result shows that the concentration distribution and the flow patterns are strongly affected by the inlet velocity, and that with the increased inlet velocity, VOC removal rate is increased, while removal efficiency is decreased. This result may be useful in the design of reactors with improved VOC removal efficiency.

**Key words:** Photocatalysis(광촉매), Numerical analysis(수치해석), Indoor air quality(실내 공기 질), Batch reactor(회분 반응기), Continuous flow reactor(연속흐름 반응기)

#### 기 호 설 명

$A_{in}$  : 입구면적 [ $m^2$ ]

$A_{out}$  : 출구면적 [ $m^2$ ]

$C_{i,in}$  : 화학종  $i$ 의 입구농도 [ $kg/m^3$ ], 식(12)

$C_{i,out}$  : 화학종  $i$ 의 출구농도 [ $kg/m^3$ ], 식(12)

$k_i$  : 화학종  $i$ 의 반응률 상수, 식(11)

$K_i$  : 화학종  $i$ 의 흡착 상수, 식(11)

$m_i$  : 화학종  $i$ 의 질량분율, 식(9)

$p$  : 공기 압력 [Pa]

$r_i$  : 화학종  $i$ 의 반응속도, 식(11)

<sup>†</sup> Corresponding author

Tel.: +82-31-201-2869; fax: +82-31-202-8106

E-mail address: woohuck@yahoo.co.kr

- $R_i$  : 화학종  $i$ 의 반응률, 식(9)  
 $Sc_i$  : Schmidt 수  
 $t$  : 시간  
 $T$  : 온도 [K]  
 $u_i$  : 순간속도  
 $\bar{u}_i$  : 평균속도  
 $u_i'$  : 순간속도의 섭동치  
 $V_{in}$  : 입구속도 [m/s], 식(12)  
 $V_{out}$  : 출구속도 [m/s], 식(12)

### 그리스 문자

- $\epsilon$  : 난류에너지를 소산율 [ $m^2/s^3$ ]  
 $k$  : 난류운동에너지 [ $m^2/s^2$ ]  
 $\mu$  : 점성계수 [ $kg/m \cdot s$ ]  
 $\mu_t$  : 난류점성계수 [ $kg/m \cdot s$ ]  
 $\rho$  : 공기 밀도 [ $kg/m^3$ ]

## 1. 서 론

최근 많은 연구에서 휘발성 유기화합물은 인간의 건강과 활동에 많은 영향을 미치는 것으로 밝혀지고 있다. 호흡기 질환과 폐암의 주요한 원인이 VOC에 오염된 공기임이 보고되고 있다. 또한 휘발성 유기화합물은 광스모그, 오존층 파괴 등의 환경문제를 야기하는 물질로 믿어지고 있다. 악취를 포함하는 휘발성 유기화합물로는 벤젠, 톨루엔, 페놀 등이 있는데 이들은 건축자재 제작 및 도장공정, 합성수지 제조공정 등에서 많이 배출되는 것으로 알려져 있다. 이러한 이유로 휘발성 유기화합물을 제거하기 위한 다양한 방법들이 연구되고 있다.

VOC 물질들을 제거하기 위한 공정으로써는 직접 연소법, 촉매연소법, 흡착법을 이용한 제거법과 미생물을 이용한 생물학적 방법 등이 주류를 이루고 있다.

최근에는 기존에 사용되었던 공정들을 대신할 수 있는 고급 산화 공정이 개발되고 있다. 가장 널리 사용되는 공정인 직접 연소법과 촉매 연소법은 VOC 물질들을 고온으로 태워서 제거하는 방법으로써 많은 에너지의 소비를 요구하며 또한

2차 오염물질의 배출이 문제가 된다. 촉매 연소법은 연소 온도를 낮출 수 있으나 반응물질에 따라 촉매의 피독 현상이 일어나거나 수명을 단축시키며 효율을 저하시키게 된다. 흡착법은 대규모의 흡착질을 필요로 하며 정기적으로 필터를 교체해 줄 필요가 있게 된다. 그리고 bio-filtration을 이용한 방법은 높은 운전비용과 대용량에 적합하다.

최근에 광촉매를 이용한 폐수 및 대기오염물질 처리에 관한 연구가 크게 주목받고 있다. 광촉매 공정은 광조사(UV light)하에 산소와 광촉매를 이용하여 유독물질을 제거하는 방법으로써 비교적 최근에 개발된 제거방법이다. 최근의 해외 연구동향으로는 Mehrab et al.<sup>(1)</sup>은 광촉매 반응에서 동적 모델을 위한 비선형 변수의 측정에 대한 연구를 수행하였고, VOC 물질의 광촉매 반응에 대하여 Ray, Chang et al., Fu et al., Yamazaki et al.의 연구<sup>(2-5)</sup>가 이루어져 왔다. 또한 Langmuir-Hinshelwood 모델<sup>(6,7)</sup>에 대하여 Wang et al.<sup>(8)</sup>이 연구를 수행했었다. 이러한 연구들은 광촉매 반응과 그에 대한 모델 확립에 관한 내용이 주류를 이루고 있다. 따라서 이와 같은 연구 성과를 바탕으로 반응기 설계에 대한 연구의 필요성이 대두되었다. Santos et al.<sup>(9)</sup> Hurley et al.<sup>(10)</sup>은 광촉매를 이용한 연속흐름 반응기 실험을 통한 연구를 수행하였다. 하지만 이와 같은 실험을 통한 연구에서는 최적 반응기 설계를 위한 반응기 내 유동형상 및 농도분포에 대한 충분한 정보를 취득하는 데 부족한 점이 있다. 그러나 CFD(Computational Fluid Dynamics)를 이용한 수치해석으로 반응기 내부에서의 유동 패턴 및 물질전달 현상에 대한 다양하고 폭넓은 정보를 얻을 수 있다.

따라서 본 연구에서는 CFD를 이용한 수치해석을 통해 반응기 형상과 운전조건에 따른 VOC 물질의 제거 특성을 연구하였다. 실제 정용 회분 반응기(constant-volume batch reactor)에서 수행된 실험결과와 수치해석상의 예측된 결과를 비교하여 수치해석의 타당성과 오차를 확인하였다. 또한 동일한 반응기에서 연속흐름 모델을 대상으로 각기 다른 유입속도 및 반응기 내부의 격막 개수와 형상에 따른 VOC 물질의 제거 특성에 대한 연구를 수행하였다.

2. 이론해석 및 수치해석

산이 수행되었다.

2.1 계산 모델의 선정

2.2 지배방정식 및 경계조건

실험<sup>(1)</sup>과 수치해석에 이용된 반응기 내부에서 격막의 개수 및 위치와 형상에 따른 계산 모델들을 Fig. 1에 나타내었다. 그림에서 보듯이 광촉매 반응기의 전체 길이는 21.5 cm이고 직경은 2.2 cm의 크기로 제작되었고 내부의 부피는 53.21 cc이다. 촉매가 코팅된 길이 13 cm, 지름 0.309 cm의 유리봉 6개가 반응기 내부에 고정되어 있으며, 반응기 위쪽에는 15 W, UV-A lamp가 설치되어 빛이 균일하게 조사되도록 되어 있다. 정용 회분 반응기의 실험조건은 반응기 내부에서 유동은 존재하지 않으며, 온도는 등온(298 K)이었다. 수치해석은 실험장치와 동일한 계산 모델과 조건을 적용하여 수행하였다. 그리고 연속흐름 반응기의 해석을 위해 반응기 내부에 격막의 개수와 형상이 다른 3가지 유형에 대해 수치해석을 수행하였는데 A형에서는 환형의 격막이 2개, B형에서는 반원형 격막이 2개, C형에서는 반원형 격막이 3개가 각각 설치되었다. 연속흐름의 경우 0.35 cm의 직경을 갖는 유입구에서 입구 공기속도가 0.01 m/s에서 2 m/s까지 변화하는 경우에 대하여 계

정용 회분반응기에서는 내부 유동이 없고 등온 조건이므로 이 경우에 대한 수치해석을 위한 지배방정식으로는 화학종 보존방정식을 사용하였다. 그러나 연속흐름 반응기에 대하여서는 난류가 존재하는 유동을 예측하기 위하여 운동량 방정식과 표준  $k-\epsilon$  방정식을 부가하여 계산하였다. 본 연구에 이용된 표준  $k-\epsilon$  방정식 난류 모델은 2방정식 모델인데, 이 모델은 실제적인 공학적 계산에 많이 이용되어져 왔으며 다양한 난류유동에 대하여 경제적이며 정확한 계산결과로 인하여 산업용 유동과 열전달 시뮬레이션에서 많이 사용되어져 왔다.

2.2.1 지배방정식

1) 연속방정식

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \tag{1}$$

$$u_i = \overline{u_i} + u_i' \tag{2}$$

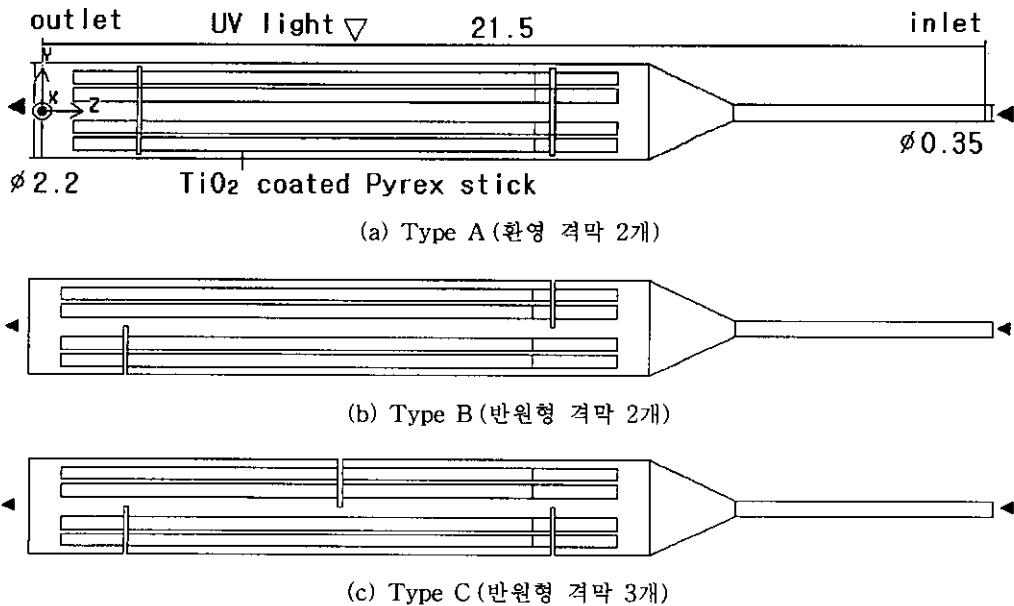


Fig. 1 Schematic diagram of reactor (unit: cm).

2) 운동량방정식

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j}(-\rho \overline{u_i' u_j'}) \quad (3)$$

3) 난류운동에너지( $k$ )방정식

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + G_k - \rho \epsilon \quad (4)$$

4) 난류에너지소산율( $\epsilon$ )방정식

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \epsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} G_k - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k} \quad (5)$$

5) 난류점성계수

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (6)$$

$$G_k = -\rho \overline{u_i' u_j'} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (7)$$

여기서,  $C_{1\epsilon}$ ,  $C_{2\epsilon}$ ,  $C_\mu$ <sup>(12)</sup> 값은 다음과 같다.

$$C_{1\epsilon} = 1.44, \quad C_{2\epsilon} = 1.92, \quad C_\mu = 0.09$$

6) 화학종 보존방정식

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho m_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j m_i) = -\frac{\partial}{\partial x_j} J_{i,j} + R_i \quad (8)$$

여기서,

$$J_{i,j} = -\left( \rho D_i + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial m_i}{\partial x_j} \quad (\text{for turbulence}) \quad (9)$$

2.2.2 경계조건과 초기조건

광촉매 표면에서 일어나는 반응은 빛에너지를

이용하기 때문에 광 반응에서는 열을 가해 줄 필요가 없으므로 다른 반응들에 비해 상온에서 반응이 잘 일어나며 따라서 에너지를 매우 적게 사용하는 반응<sup>(13)</sup>이 된다. 따라서 반응기 내부에서 일어나는 온도변화는 크지 않으므로 등온(298 K)으로 가정하였으며 반응물질과 생성물질의 확산계수 또한 298 K에서 1기압 희박기체 혼합물의 2종 확산계수<sup>(14)</sup>를 이용하였다. TiO<sub>2</sub> 촉매가 코팅된 유리봉의 표면에는 실제 실험에서 얻은 Langmuir-Hinshelwood 반응식을 경계조건으로 사용하였다. UV light가 반응기에 균일하게 조사되고 있으므로 광원과 반응면 사이의 기하학적 형상으로 인한 거리에 대한 빛의 강도와 파장에 의한 반응효과는 없는 것으로 가정하였다. 대부분의 광촉매 반응은 heterogeneous catalytic계의 분해 반응식인 Langmuir-Hinshelwood의 아래와 같은 반응식을 따른다.

$$-r_i = -\frac{dC_i}{dt} = \frac{k_i K_i C_i}{1 + K_i C_i} \quad (10)$$

$$\frac{1}{-r_i} = \frac{1}{k_i} + \frac{1}{k_i K_i} \left( \frac{1}{C_i} \right) \quad (11)$$

정용 회분 반응기의 수치해석에서 초기 반응물질과 초기 농도는 실제 실험조건과 동일하게 에탄올 100 ppm을 사용하였으며 비정상상태로 계산하였다. 그리고, 연속흐름 반응기에 대해서는 정상상태의 유동에 대하여, 광촉매 코팅 표면에 동일한 Langmuir-Hinshelwood 반응식을 경계조건으로 사용하였다. 실험에 의해서 구해진 에탄올의 광분해 반응에 대한  $k_i$ 는 48.239이며,  $K_i$ 는 0.00237이었다. 그리고 위의 반응식이 수치해

Table 1 Boundary conditions

Inlet velocity [m/s]	Reactor type		
	A	B	C
0.01	$T=298 \text{ K}$ At wall : $\frac{\partial C}{\partial r} = \frac{\partial C}{\partial \theta} = 0$ At inlet : $C_{C_2H_5OH} = 100 \text{ ppm}$		
0.05			
0.2			
0.3			
0.4			
0.6			
1			
2			

Table 2 Material properties and diffusion coefficient

	Formula	Molar mass (kg/kmol)	Gas constant (kJ/kgK)	Diffusion coefficient (m <sup>2</sup> /s)
Carbon dioxide	CO <sub>2</sub>	44.01	0.1889	1.6×10 <sup>-5</sup>
Ethyl alcohol	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	46.07	0.1805	1.2×10 <sup>-5</sup>
Oxygen	O <sub>2</sub>	31.999	0.2598	2.1×10 <sup>-5</sup>
Water vapor	H <sub>2</sub> O	18.015	0.4615	2.5×10 <sup>-5</sup>

석에서 광촉매 반응 표면의 경계조건으로 사용되어졌다.

여러 경계조건은 Table 1에 나타나 있으며 반응물질과 생성물에 대한 확산계수와 물성값이 Table 2에 나타나 있다.

### 2.3 수치계산

광촉매 반응기 내부의 유동장 및 농도장, 그리고 화학반응을 해석하기 위하여 유한 체적법에 근거한 상용코드인 FLUENT/UNS를 이용하여 3차원 수치해석을 수행하였다. 본 수치계산에서 사용된 격자구조가 Fig. 2에 나타나 있다. 격자구조는 비정렬 격자구조를 사용하였다. 화학반응이 이루어지는 촉매가 코팅되어진 봉 주위에는 농도구배가 클 것으로 예상되어지므로 조밀한 격자를

배치하였다. 반응기 모델 A형에서는 88,741개, B형에서는 87,518개, C형에서는 84,871개의 격자가 계산에 이용되어졌다. 해의 수렴 여부의 판단에 대하여 속도 및 화학종의 농도값 등 주요 변수값들의 normalized residual이 10<sup>-5</sup>일 때 수렴한 것으로 간주하였다.

### 3. 결과 및 고찰

#### 3.1 정용 회전 반응기에서의 예비적 결과

A물질의 반응속도라 함은 성분 A에 대하여, 반응 혼합물의 단위면적 및 단위시간당 생성되는 A의 물질량(Kmol)이라 할 수 있다. 수치해석에서 구해진 시간에 따른 농도측정값과 반응물의 전환율이 Fig. 3에 비교되어 나타나 있다. 이 그

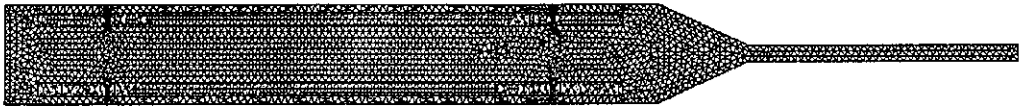


Fig. 2 Computational mesh (type A).

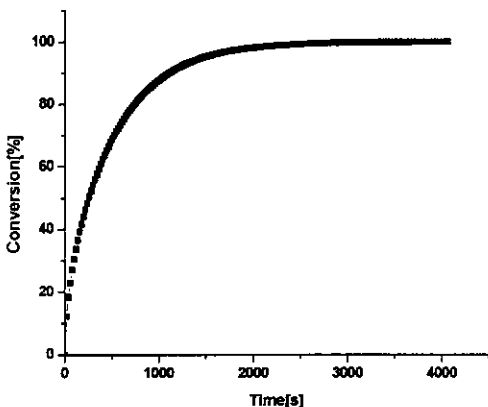


Fig. 3 Photodegradation of ethanol with respect to time.

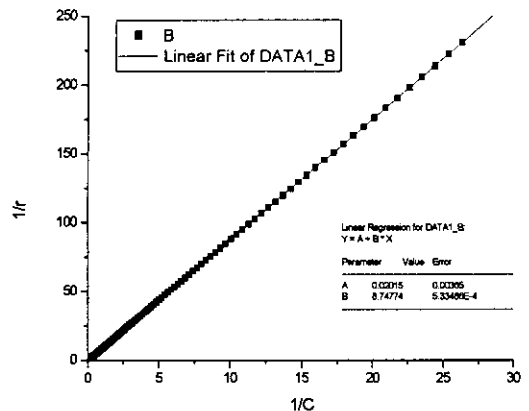


Fig. 4 Linear regression of photo-decomposition of ethanol.

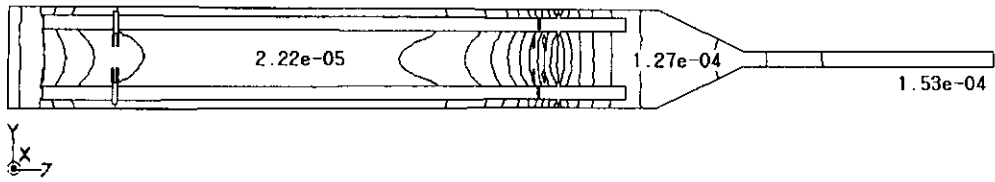


Fig. 5 Contour of ethanol concentration in the batch type reactor ( $\text{kg/m}^3$ ).

림에서 반응개시 후 10분 뒤의 전환율이 약 65%를 나타내고 있다. 반응속도와 반응물질의 농도와와의 관계를 도시하면 Fig. 4에서 나타난 바와 같이 계산값이 직선의 방정식에 잘 적용됨을 볼 수 있는데 식(10)과 (11)을 이용하면  $K_f=0.00237$ 와  $k_f=48.234$ 의 값을 얻을 수 있다. 실험에서 구해진 값은  $K_f=0.00237$ ,  $k_f=48.239$ 이므로 약  $10^{-4}$  오차를 보여주고 있다.

반응개시 후 10분 후의 에탄올의 농도 분포가 Fig. 5에 나타나 있다. 이 그림에서 광촉매가 코팅되어 있는 유리봉 부위는 낮은 농도 분포를 보이고 있다. 이는 광촉매 반응에 의하여 산소와 에탄올이 반응하였기 때문이다. 그러나 광촉매가 코팅된 유리봉과 멀리 떨어진 직경이 작은 우측 영역에서는 매우 높은 에탄올의 농도 분포를 보이고 있다. 우측의 에탄올의 고농도 지역과 광촉매 반응영역 사이에 농도구배가 발생되어, 이 구

배로 인하여 좌측의 저농도 지역으로 확산된다.

### 3.2 연속흐름 반응기에서의 VOC 제거 특성

Fig. 6은 유입속도 1 m/s의 경우 연속흐름 반응기 내부에서의 에탄올의 농도 분포를 나타내고 있다. 반응기 내부의 격막의 형태와 개수에 따라 각기 다른 농도 분포와 유동형상을 보이고 있다. Type A에서는 입구에서 유입된 에탄올은 환형의 첫번째 격막을 통과하고 촉매가 코팅된 유리봉 영역에서 광촉매 반응을 한다. 하류로 흐를수록 차츰 에탄올의 농도가 감소를 하게 되어 하류측에서는 유입 농도의 약 69% 수준으로 감소하게 된다. 전체적인 유동형태는 두 개의 환형 격막 사이에서 입구속도에 비해 매우 작은 속도 분포를 보이고 있다. Type B에서는 2개의 반원형 격막이 Type A에서의 격막의 위치와 동일한 지점

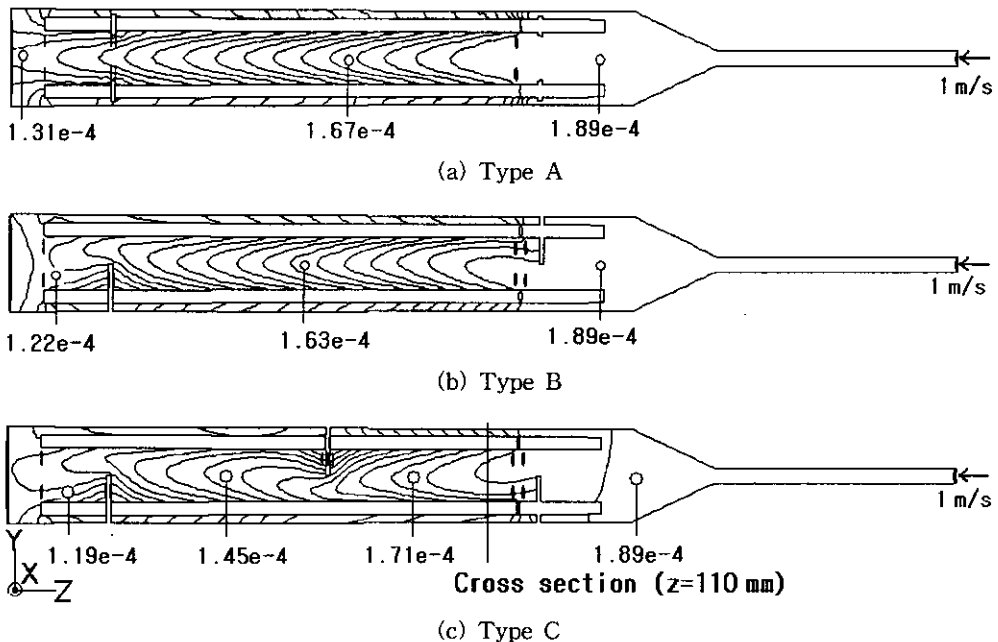


Fig. 6 Contours of ethanol concentration ( $\text{kg/m}^3$ ) (inlet velocity=1 m/s).

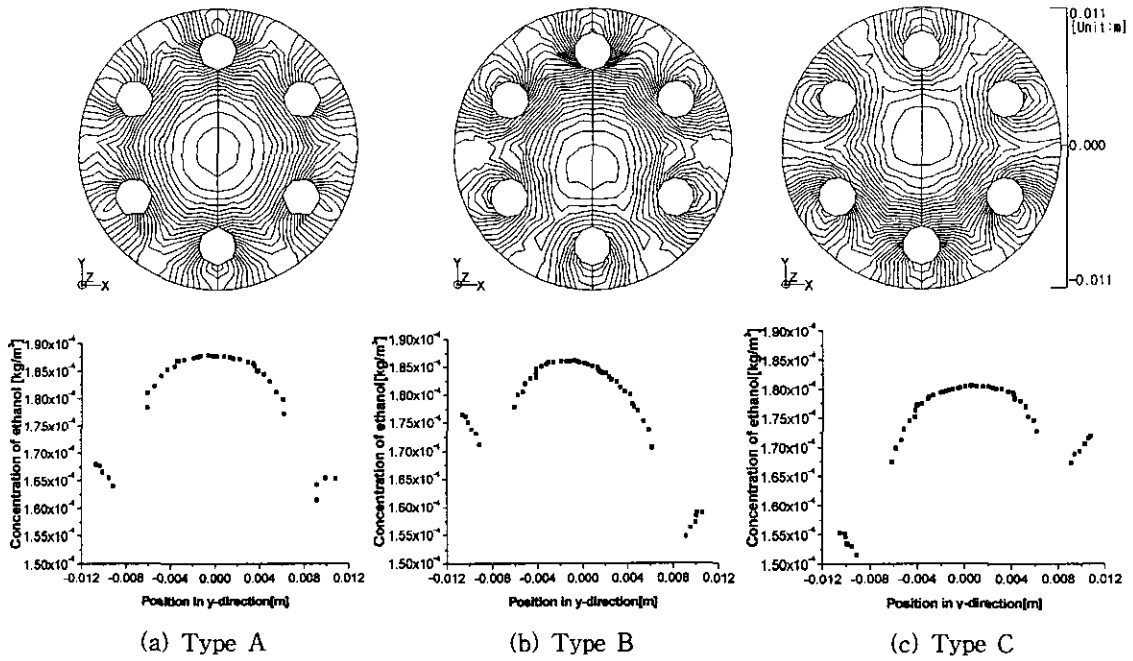


Fig. 7 Contours of ethanol concentration in the cross section at  $z=110$  mm and concentration distribution in y-direction (inlet velocity = 1 m/s).

에 설치되어 있다. 입구에서 유입된 에탄올이 함유된 공기는 첫번째 반원형 격막에 의하여 유동 방향이 바뀌게 되고 속도도 감소하게 된다. 하류에서의 에탄올의 농도는 유입 농도의 약 67%이다. Type C에서는 반원형 격막이 Type B의 2개의 격막 사이의 중앙 지점에 1개 추가 설치되었다. 유동의 형상은 Type A와 Type B에 비해 복잡해졌다. 3개의 격막에 의하여 주류의 흐름이 굴절되고 있다. 하류에서의 농도는 유입 농도의 약 64%이다.

유리봉의 표면과 움직이는 유체 사이에서는 대류물질전달(convective mass transfer)과 물질확산(mass diffusion)이 발생한다. Fig. 6의 (c)에서 나타나 있듯이 반응기 내부의 우측의 첫번째 격막으로부터 하류측으로 7.7 mm 떨어진 지점( $z=110$  mm)에서 반응기 단면의 농도 분포와 그 단면에서 y축 방향으로 분포된 격자점들에서 농도가 Fig. 7에 나타나 있다. Type A에서는 환형의 격막을 통과한 유동이 축 중심으로 흐르고 있으므로 가장 높은 농도가 축을 중심으로 나타나고 있으며 유리봉 근처에서 비교적 낮은 농도가 나타나 있다. 이는 유리봉 표면의 광촉매 반응에 의하여 에탄올이 제거되고 있기 때문이다. 그리

고, Type B와 C에서는 격막에 의하여 유동이 굴절되어 흐르고 있다. 이러한 영향으로 Type B의 경우에 단면의 하단부에서, Type C의 경우에는 단면의 상단부에서 유속이 빠르며 이러한 빠른 부분에 에탄올의 고농도 영역이 분포한다. 즉, 고농도 영역이 축 중심에서 벗어나 치우쳐 분포하고 있다. 그러나 유리봉 근처에서는 광촉매 반응으로 인하여 반응물질이 제거되고 있으므로 낮은 농도를 보인다. 따라서 Type C는 격막의 개수가 Type B보다 1개 추가되어 있으므로 유동의 굴절이 더 심하고, 전체적으로 반응기 안에서 물질의 고농도 영역과 저농도 영역이 뒤섞이는 현상이 더욱 활발하게 된다. 이러한 현상이 Type C의 유입속도 1 m/s인 경우에 대하여 Fig. 8에 나타

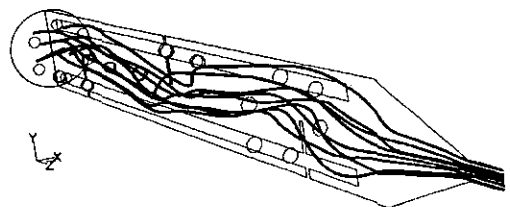


Fig. 8 Particle trajectory (type C, inlet velocity = 1 m/s).

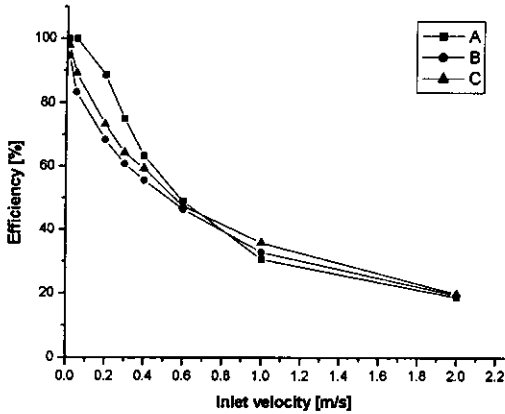


Fig. 9 VOC removal efficiency (%).

나 있다. 입구에서 유입된 임의의 유체입자의 시간경과에 따른 반응기 내부의 유선이 나타나 있는데, 입자가 3개의 격막에 의하여 유동 방향이 굴절되어지고 유동의 중심이 편향되는 현상이 3차원적으로 나타나 있다.

입구속도와 반응기의 격막의 형태에 따른 제거효율( $\eta$ )이 얻어졌다. 제거효율은 유입된 에탄올의 질량유량에 대한 에탄올의 유입과 유출질량유량의 차이(즉, 제거된 에탄올 질량)를 의미하며 다음의 식에 의하여 계산되었다.

$$\eta [\%] = \frac{(\dot{m}_{i,in} - \dot{m}_{i,out})}{\dot{m}_{i,in}} \times 100 \quad (12)$$

여기서,

$$\begin{aligned} \dot{m}_{i,in} &= C_{i,in} V_{in} A_{in} \\ \dot{m}_{i,out} &= C_{i,out} V_{out} A_{out} \end{aligned}$$

이다. 제거효율을 나타낸 Fig. 9에서 볼 때 입구속도가 0.01~0.6 m/s인 구간에서는 Type A가 Type B와 C와 비해서 효율이 높다. 그러나 입구속도가 0.6~1.0 m/s인 구간에서 역전되어 1.0 m/s 이상인 구간에서는 제거효율이 Type C에서 가장 높고, Type A에서 상대적으로 가장 낮은 경향을 보였다. VOC 물질의 절대적 제거량이 Fig. 10에 제시되어 있는데, 유입속도가 증가할수록 전반적으로 에탄올 제거량은 증가하고 있으며, Type C가 Type B와 A에 비하여 비교적 높은 제거량을 나타내었다.

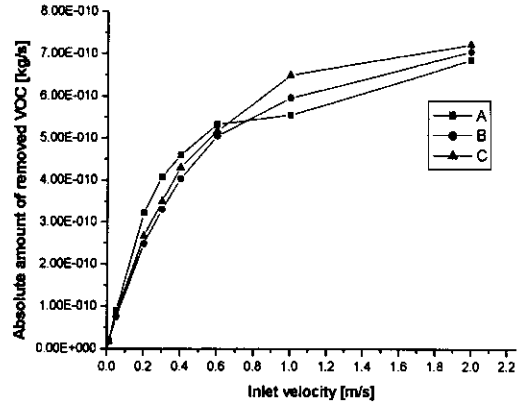


Fig. 10 Absolute amount of removed VOC (kg/s).

이러한 결과는 Fig. 6, 7, 8에서 보인 바와 같이 유입속도가 높은 경우 격막에 의해 발생하는 유동 방향의 굴절과 유동 중심의 편향 때문이다. 즉, 이러한 유체의 운동은 광축매 반응이 일어나는 유리봉 표면 근방의 저농도 유체를 제거하고 더 나아가 고농도 유체로 대치함으로써 물질전달을 촉진시키게 된다. 또한 격막에 의하여 저농도와 고농도 지역이 서로 교반되어 잘 섞이게 되므로 높은 속도 영역에서는 Type C가 Type B와 A에 비하여 높은 제거효율을 보인다.

Reynolds는 모든 난류변수  $N$ 은 시간 평균값  $\bar{N}$ 와 난동성분(fluctuation)  $N'$ 가 중첩되어 일어난다고 생각하였다. 그리고 일반적으로 난동강도(intensity of turbulence fluctuation)는 제곱평균 제곱근(root-mean-square)값을 사용하며, 다음의 식에 의하여 계산된다.

$$N_{r.m.s} = \sqrt{N'^2} \quad (13)$$

여기서,

$$N = \bar{N} + N'$$

그리고 유입속도 1 m/s인 경우에서 유동 영역과 반응 표면으로부터 0.001 mm 떨어진 영역의 질량가중평균(mass-weighted average)된 난동강도가 Fig. 11에 나타나 있다. Type B와 Type C가 Type A에 비해서 비교적 높은 값을 보이고 있다. 난류에서 빠른 속도의 섭동(fluctuation)으로



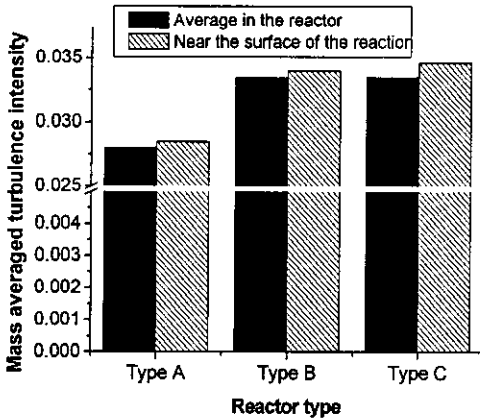


Fig. 11 Mass averaged turbulence intensity (inlet velocity=1 m/s).

인하여 발생하는 유체의 격렬한 혼합은 유체 입자 사이에서 물질전달을 촉진시킨다. Type C에서 난류강도가 큰 것도 물질전달이 증가되는 요인으로 작용하고 있다.

4. 결 론

정용 회분 반응기 및 연속흐름 반응기에서의 TiO<sub>2</sub> 광촉매에 의한 VOC(에탄올) 물질 제거에 관한 특성이 연구되었다. 먼저 정용 회분 반응기에 대하여 해석되었다. 실험에서 측정된 데이터는 Langmuir-Hinshelwood의 반응 모델에 잘 부합되는 결과를 보여주었는데 이 모델의  $K_i$  값과  $k_i$  값을 반응 표면의 경계조건으로 사용하여 수치계산을 하였으며, 시간에 따른 반응물질의 전환율과 내부 농도분포를 예측하였다. 계산된 내부 농도변화를 이용하여 수치계산으로 얻은  $K_i$  와  $k_i$  는 실험에서 구한 것과 잘 일치하였다.

그리고, 연속흐름의 경우에 대하여 동일한 반응기에서의 광촉매 반응을 해석하였다. 입구속도가 증가함에 따라 전반적으로 제거효율이 감소되는 경향을 나타내었다. 그리고 주유동 방향의 분포는 격막이 환형인 Type A의 경우에 축 중심으로 원형으로 분포하고 있으나, 반원형 격막이 설치된 Type B와 Type C에서는 격막의 영향으로 인하여 유동 방향이 굴절되어 축 중심으로부터 편향된 농도분포를 나타내는 구간이 존재하였다. 유입속도가 빠른 경우에 Type B와 C는 Type A

에 비하여 물질대류와 확산에 의해 VOC 제거 효율이 상승하는 경향을 보였다.

본 연구에서는 연속흐름형 반응기에서 격막의 형상 및 개수, 그리고 유입속도 등의 설계변수에 대한 VOC 제거 특성이 예측되었는데 이는 광촉매 반응기의 설계를 위한 기초자료로 활용될 수 있을 것이다.

후 기

본 연구는 2001년 학술진흥재단의 지원(KRF-1999-005-E00025)에 의하여 수행되었음을 밝히며, 이에 감사드립니다.

참고문헌

- Mehrab, M., Anderson, W. A., Murray, M. Y. and Reilly, P. M., 2000, Non-linear parameter estimation for a dynamic model in photocatalytic reaction engineering, Chemical Engineering Science, Vol. 55, pp. 4885-4891.
- Ray, M. B., 2000, Photodegradation of the volatile organic compounds in the gas phase: a review, Developments in chemical engineering and mineral processing, Vol. 8, pp. 405-439.
- Chang, H. T., Wu, N. M. and Zhu, F., 2000, A kinetic model for photocatalytic degradation of organic contaminants in a thin-film TiO<sub>2</sub> catalyst, Vol. 34, No. 6, pp. 407-416.
- Fu, X., Zeltner, W. A. and Anderson, M. A., 1995, The gas-phase photocatalytic mineralization of benzene on porous titania-based catalysts, Applied Catalysis B: Environmental, Vol. 6, pp. 209-224.
- Yamazaki, S., Tanaka, S. and Tsukamoto, H., 1999, Kinetic studies of oxidation of ethylene over a TiO<sub>2</sub> photocatalyst, Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, Vol. 121, pp. 55-61.
- Hinshelwood, C. N., 1940, The Kinetics of Chemical Change, Clarendon Press, Oxford.
- Hoffmann, M. R., Martin, S. T., Choi, W.

- and Bahnemann, D. W., 1995, Environmental Applications of Semiconductor Photocatalysis, American Chemical Society, Vol. 95, pp. 69-96.
8. Wang, K. H., Tsai, H. H. and Hsieh, Y. H., 1998, A study of photocatalytic degradation of trichloroethylene in vapor phase on TiO<sub>2</sub> photocatalyst, Chemosphere, Vol. 36, No. 13, pp. 2763-2773.
  9. Santos, A., Bahamonde, A., Schmid, M., Avila, P. and Garcia-Ochoa, F., 1998, Mass transfer influences on the design of selective catalytic reduction (SCR) monolithic reactors, Chemical Engineering and Processing, Vol. 37, Issue 2, pp. 117-124.
  10. Hurley, D. T., Chang, Y. S., Japar, M. and Wallington, T. J., 1998, Measurement of VOC reactivities using a photochemical flow reactor, Vol. 32, pp. 1913-1919.
  11. Kim, D. I., 2001, A study on photo-decomposition of Ethanol with TiO<sub>2</sub> Photocatalysts, MS thesis, Kyung hee University, Seoul, Korea.
  12. Launder, B. E. and Spalding, D. B., 1974, The numerical computation of turbulence flows, Computing Methods Applied Mechanical Engineering, Vol. 3, pp. 269-289.
  13. Herrmann, J. M., 1999, Heterogeneous photocatalysis: fundamentals and applications to the removal of various types of aqueous pollutants, Catalysis Today, Vol. 53, pp. 115-129.
  14. Perry, J. H., 1963, Chemical Engineering Handbook, 4th ed., McGraw-Hill, New York.